

Análisis multivariante de datos químicos en Granitoides Tardihercínicos

Multivariate analysis of chemical data of Late-Hercynian Granitoids

V. Herreros

Departamento de Petrología y Geoquímica. Fac. Cc. Geológicas, U.C.M. 28040 - Madrid.

ABSTRACT

The application of multivariate analysis to whole rock chemical data allow us to obtain important conclusions about their particular evolutive history. In the example developed below, starting from one population of late-Hercynian granitoids previously classified into several groups by means of lithological and petrographical criteria, it is possible to establish their degree of petrogenetical meaning as plutonic units, the relative complexity of the processes that act upon their evolution and the simplest geochemical parameters that control it.

Key words: Multivariate analysis, late-Hercynian granitoids, Sierra de Gredos.

Geogaceta, 20 (3) (1996), 597-600

ISSN: 0213683X

Introducción

El estudio de datos químicos de roca total en granitoides es llevado a cabo habitualmente mediante el tratamiento de un pequeño número de variables (por ejemplo, diagramas de variación entre dos óxidos) o de más de dos combinadas en rígidas funciones lineales (por ejemplo, diagramas multivariados de Debon y Le Fort, 1983). Estos procedimientos están ampliamente difundidos, por lo cual permiten la comparación entre rocas de diferentes ámbitos. No obstante, cuentan con una seria desventaja, que es el hecho de que cada episodio magmático posee unas peculiaridades que impiden su identificación plena con otros episodios. De ahí se derivan las múltiples críticas recibidas por los intentos de establecer clasificaciones geoquímicas con una fuerte carga genética, como es el caso de los diagramas de discriminación tectónica de Pearce *et al.*, (1984) o la clasificación en tipos I y S de Chappell y White (1974).

El problema se plantea al intentar establecer las características particulares de un determinado conjunto de granitoides. La única solución radica en tener en cuenta a un tiempo el mayor número posible de variables o elementos analizados. Para ello, es necesario recurrir a procedimientos matemáticos, de entre los cuales el estudio de los coeficientes de correlación lineal y el análisis multivariante (funciones discriminantes, componentes principales, etc.) destacan como los más flexibles y valiosos. Todos ellos, aplicados al ámbito de las ciencias geológicas, se encuentran recogidos en diversas publicaciones genéricas (Agterberg, 1974; Le Maitre, 1982; Rollinson, 1993; Davis, 1986) y en multitud de trabajos concretos (por ejemplo, Bellido y Brändle, 1979;

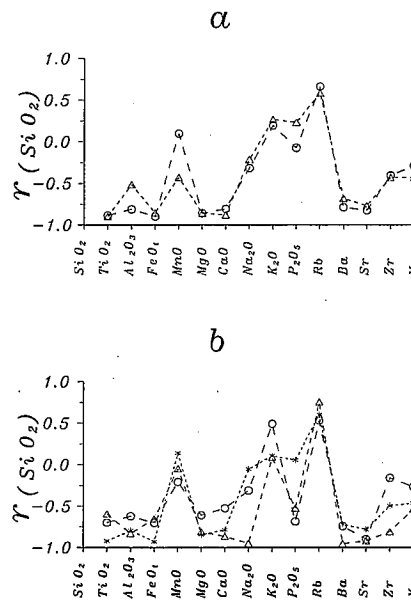


Fig. 1.- Coeficientes de correlación entre SiO_2 y los demás elementos. a) Para todos los datos. Círculos: Grupo regional. Triángulos: Grupo circunscrito. b) Para el episodio regional. Asteriscos: Navalosa común. Triángulos: Navalosa porfídico. Círculos: Navacepedilla.

Fig. 1.- Correlation coefficients between SiO_2 and the other elements. a) For the overall data. Circles: Regional group. Triangles: Circumscribed group. b) For the regional episode. Asterisks: Navalosa, common facies. Triangles: Navalosa, porphyritic facies. Circles: Navacepedilla.

Bea y Moreno-Ventas, 1985; Richard y Clarke, 1989; Chandrasekaran y Srivastava, 1992; Herreros *et al.*, 1993).

En el presente artículo, se aplican los tres procedimientos mencionados a granitoides del sector oriental de la Sierra de Gredos (Sistema Central Español) y se discute la relación existente entre los resultados obtenidos mediante dichos métodos y la petrogenesis granítica del área.

Caracterización geológica de las muestras estudiadas

Se ha realizado un muestreo selectivo de los granitoides del sector, analizando sobre roca total los elementos mayores y cinco de los elementos traza más abundantes (Rb, Ba, Sr, Zr e Y). Sus valores medios figuran en la Tabla 1. Se trata de monzogranitos, granodioritas y granitos biotíticos, en ocasiones con moscovita y/o cordierita, accesorios como apatito, circón, ilmenita, monacita y allanita, y de tardi- a postorogénicos respecto a las fases deformativas principales hercínicas (Herreros, en prensa, a; Herreros, en prensa, b). Son moderadamente peraluminicos, con características propias de series calcoalcalinas altas en potasio que evolucionan por cristalización fraccionada de feldespatos y, en menor proporción, biotita y circón. Pueden distinguirse dos grandes grupos, un episodio regional o contemporáneo con la F_4 hercínica (monzogranitos y granodioritas biotíticos de grano medio y grueso con megacristales de feldespato potásico) y un segundo episodio, formado por una serie de plutones circunscritos posteriores a la F_4 que intruyen en los granitoides del primer episodio y representan fundidos más evolucionados.

La agrupación de las diferentes muestras

GRUPO	REGIONAL			CIRC.	
	NAVALOSA		NAVC	VC	NAVD
	Común	Porfídico			
Nº muestras	42	6	7	3	8

	Media	σ	Media	σ	Media	σ	Media	σ	Media	σ
SiO ₂	68.25	1.8	69.69	2.1	70.52	0.9	73.26	0.7	70.87	2.2
TiO ₂	0.53	0.1	0.48	0.1	0.42	0.1	0.23	0.0	0.40	0.1
Al ₂ O ₃	15.10	0.6	14.81	0.8	14.61	0.3	14.19	0.3	14.24	0.9
FeO _{tot}	3.38	0.6	2.90	0.7	2.68	0.4	1.75	0.3	2.71	0.4
MnO	0.06	0.0	0.05	0.0	0.05	0.0	0.04	0.0	0.04	0.0
MgO	1.13	0.3	0.84	0.3	0.70	0.1	0.62	0.3	0.74	0.2
CaO	2.32	0.4	1.97	0.4	1.59	0.4	0.71	0.2	1.77	0.5
Na ₂ O	3.54	0.2	3.32	0.3	3.28	0.3	3.03	0.4	3.27	0.3
K ₂ O	4.26	0.4	4.56	0.5	4.80	0.3	4.66	0.2	4.55	0.5
P ₂ O ₅	0.20	0.1	0.18	0.0	0.17	0.0	0.25	0.1	0.14	0.0
Rb	184	40.2	200	17.0	257	39.2	305	39.3	200	27.1
Ba	519	111.5	330	37.2	395	60.7	233	148.2	404	232.9
Sr	136	27.1	98	29.4	93	13.8	58	27.3	108	27.4
Zr	158	40.0	142	26.8	171	46.1	109	26.4	195	41.1
Y	28	7.4	20	7.0	34	8.1	12	2.1	32	5.2

GRUPO	CIRCUNSCRITO					
	GAR	SJ	MAJ	BOQ	SMV	SLB
	Nº muestras	3	5	2	3	1

	Media	σ	Media	σ	Media	σ	Media	σ		
SiO ₂	73.94	0.4	72.76	0.5	70.25	0.2	72.09	1.9	75.21	73.72
TiO ₂	0.21	0.0	0.25	0.0	0.40	0.0	0.26	0.2	0.09	0.17
Al ₂ O ₃	14.35	0.1	14.01	0.2	14.72	0.1	14.59	0.5	14.51	14.43
FeO _{tot}	1.58	0.0	1.89	0.1	2.74	0.0	1.87	0.8	1.02	1.19
MnO	0.04	0.0	0.03	0.0	0.06	0.0	0.04	0.0	0.05	0.02
MgO	0.31	0.0	0.42	0.1	0.90	0.0	0.43	0.3	0.08	0.32
CaO	0.65	0.2	1.11	0.2	1.62	0.0	0.94	0.7	0.32	0.73
Na ₂ O	2.92	0.2	3.63	0.3	3.46	0.1	3.21	0.2	3.57	3.56
K ₂ O	5.23	0.1	4.90	0.3	4.48	0.1	4.69	0.5	4.20	5.13
P ₂ O ₅	0.19	0.0	0.17	0.0	0.18	0.0	0.33	0.1	0.23	0.23
Rb	260	44.6	238	6.9	193	15.7	278	13.0	414	246
Ba	301	62.5	369	33.6	375	35.7	191	9.3	5	232
Sr	65	21.4	73	9.8	103	2.1	45	0.6	3	51
Zr	115	22.9	138	13.5	127	33.8	63	11.2	32	91
Y	19	6.6	24	6.1	15	1.8	7	1.8	4	7

Tabla 1.- Valores medios y desviaciones estándar de las diferentes agrupaciones graníticas de la región. NAVC: Navacepedilla. VC: Venero Claro. NAVD: Navadijos. GAR: Garganta. SJ: S.Juan-El Barraco. MAJ: Majadillas. BOQ: Boquerones. SMV: S.Martín. SLB: El Salobral.

Table 1.- Average values and standard deviations of the granitoid groups of the region. NAVC: Navacepedilla. VC: Venero Claro. NAVD: Navadijos. GAR: Garganta. SJ: S.Juan-El Barraco. MAJ: Majadillas. BOQ: Boquerones. SMV: S.Martín. SLB: El Salobral.

analizadas en plutones y unidades intrusivas se ha realizado en función de sus características litológicas y petrográficas. A pesar de ser éstas lo suficientemente distintivas, se pretende que tengan una fuerte interrelación con la génesis plutónica de la región. La comprobación de la existencia de ese nexo de unión procede, en una primera aproximación, del análisis de las matrices de coeficientes de correlación lineal y, posteriormente, del estudio multivariante de los datos.

Coefficientes de correlación lineal

El coeficiente de correlación lineal es la medida más sencilla de la relación lineal existente entre dos variables. De entre dichos coeficientes, se han seleccionado los que son estadísticamente significativos para un nivel de confianza del 95% en función del número de muestras del que se ha partido.

Si consideramos todos los datos a un tiempo, es de destacar la gran cantidad de coeficientes mayores de 0.7 en valor absoluto, lo cual indica, *a priori*, un grado restringido de variabilidad en los procesos responsables de la diversificación de estos granitoides, es decir, que el número de mecanismos genéticos que han actuado sobre el conjunto litológico que nos ocupa es pequeño.

Tratando por separado a cada uno de los dos grandes grupos de granitoides, puede observarse que los pertenecientes al episodio regional presentan un mayor grado de homogeneidad (mayores coeficientes de correlación lineal) que los del segundo episodio. En términos geológicos, aquéllos forman un grupo con significado petrogenético unitario, mientras que el carácter común de estos últimos es simplemente su relación de intrusividad sobre el grupo regional. Este aspecto es también puesto en evidencia en los diagramas de la Figura 1, que expresan gráficamente algunos de los valores de los coeficientes de correlación lineal entre todos los elementos considerados. En la Figura 1a se han seleccionado los coeficientes de la SiO₂, aunque las mismas conclusiones son perfectamente aplicables a todos los demás elementos analizados. Puede observarse la diferencia existente entre el grupo regional y el segundo episodio, el cual presenta menores coeficientes en valor absoluto. Analizando en detalle aquel grupo (Figura 1b), se aprecian ciertas diferencias entre los plutones que lo integran. No obstante, presenta una mayor uniformidad en conjunto que el segundo episodio.

Funciones discriminantes

El análisis múltiple discriminante proporciona una serie de funciones lineales en el espacio multidimensional definido por las variables utilizadas que permite separar unos grupos de otros y, por tanto, visualizar las diferencias existentes entre ellos. Considerando todo el volumen de datos analíticos, la función discriminante que mejor distingue entre esos dos episodios (Tabla 2) caracteriza al grupo regional por unos mayores contenidos en TiO₂, Al₂O₃, MgO, CaO, K₂O y P₂O₅ y menores proporciones de FeO₁ y MnO respecto al segundo grupo.

Considerando solamente las muestras pertenecientes al grupo regional en sus tres variedades (plutón de Navacepedilla y facies común y porfídica del complejo plutónico de Navalosa), se han establecido dos funciones discriminantes, FD1 y FD2 (Tabla 2). Empleándolas conjuntamente, la clasificación de este conjunto de datos en tres grupos es casi perfecta (Figura 2a). El plutón de Navacepedilla se caracteriza por sus mayores contenidos en TiO₂ y Al₂O₃ y menores en Na₂O frente al complejo plutónico de Navalosa, mientras que, dentro de este último, la facies común presenta mayores contenidos en P₂O₅ y MgO y la facies porfídica está enriquecida en MnO.

El mismo tratamiento se ha realizado sobre el conjunto de granitoides intrusivos en el episodio regional. El estudio mediante funciones discriminantes también permite una clara diferenciación de los ocho plutones estudiados. Mediante FD1 y

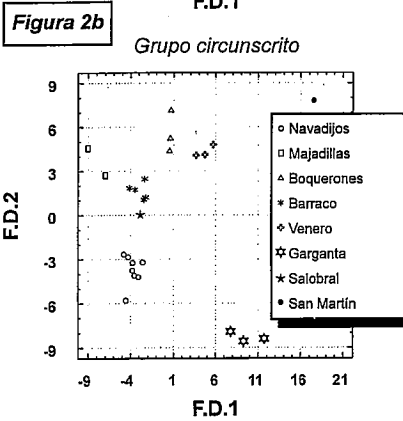
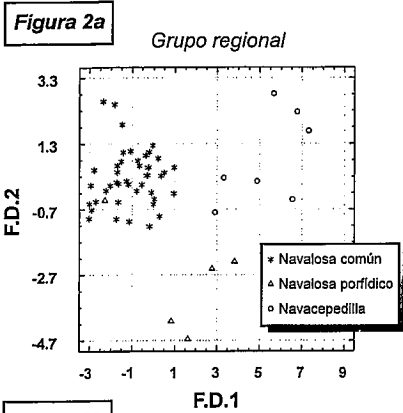


Fig. 2.- Relación entre las dos primeras funciones discriminantes.

Fig. 2.- Relationship between the first two discriminant functions.

FD2 (Tabla 2 y Figura 2b) quedan caracterizados de un modo distintivo frente al resto los plutones de San Martín (elevados contenidos en MnO y P₂O₅), Garganta (mayores contenidos en TiO₂ y menores en P₂O₅), Navadijos (bajo MnO) y Ma-

jadillas (P₂O₅ elevado y TiO₂ bajo). Los plutones restantes quedan en campos comunes, pero su separación es neta si acudimos a FD4 (distingue entre El Barraco y El Salobral) o a FD3 (para los plutones de Venero Claro y Boquerones).

Componentes principales

Mientras que el estudio mediante funciones discriminantes tiene como objetivo fundamental distinguir entre muestras pertenecientes a diferentes poblaciones, el análisis de componentes principales tiene un carácter intrapoblacional, es decir, permite cuantificar en el espacio multivariante las características geométricas de una sola población. Dichas características están condicionadas por la naturaleza de las diversas variables que intervengan en los cálculos realizados, que en este caso son los % en peso o las p.p.m. de los elementos analizados. Por tanto, la geometría de la población será un reflejo de los mecanismos petrogenéticos experimentados por el conjunto de datos durante su evolución y también de la composición de los protolitos de los que derivan los granitoides.

Como primera aproximación, se ha partido de todo el conjunto de datos. Para explicar el 90% de la variación de la población es necesario calcular hasta cinco vectores principales, lo cual es un reflejo de la diversidad existente en el conjunto plutónico. No obstante, utilizando los dos primeros vectores principales (C.P.1 y C.P.2 en la Tabla 3 y Figura 3a), mediante los que se obtiene por definición la mayor dispersión de los datos, puede observarse que las muestras se alinean según dos pautas en función del episodio al que pertenezcan. Así, los granitoides regionales (pauta subparalela al primer vector principal) están controlados esencialmente por una disminución de TiO₂, FeO, MgO, CaO, Ba y Sr al aumentar la

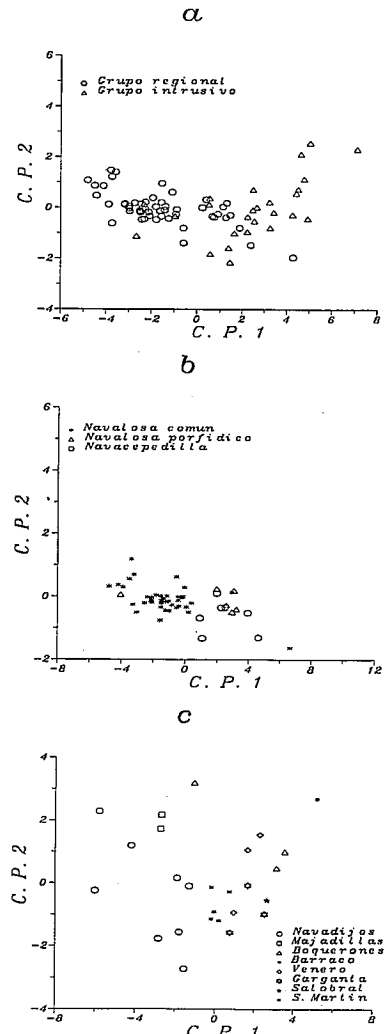


Fig. 3.- Relación entre los dos primeros vectores principales. a) Para todos los datos. b) Para el episodio regional. c) Para el episodio circunscrito.

Fig. 3.- Relationship between the first two eigenvectors. a) For the overall data. b) For the regional episode. c) For the circumscribed episode.

SiO₂ y, en menor proporción, el Rb. Los plutones circunscritos vienen condicionados por incrementos en MnO y P₂O₅ al disminuir el K₂O (subparalelo al segundo vector principal). El primer vector es un reflejo de la evolución magmática hacia términos más ácidos y con menor contenido en minerales ferromagnesianos a medida que progresa la diferenciación. El segundo vector tiene un significado menos claro. Pone de manifiesto el antagonismo existente entre la cristalización de minerales que incorporan K₂O en su estructura y aquellos otros que incorporan MnO o P₂O₅. Mientras que los minerales potásicos son relativamente tardíos (feldespato potásico y biotita principalmente), los que contienen MnO (allanita, ilmenita) o P₂O₅ (apatito, monacita, circón) se generan en etapas tempranas de la cristalización magmática, quedando englobados como fases accesorias dentro de aquellos otros.

GRUPO	REGIONAL		CIRCUNSCRITO				
	TODOS	F.D.1	F.D.2	F.D.1	F.D.2	F.D.3	F.D.4
SiO ₂	-0.01	1.60	0.80	-0.85	-5.01	0.28	3.93
TiO ₂	-5.23	25.68	3.24	79.92	-69.81	76.80	46.72
Al ₂ O ₃	-0.27	4.77	1.25	4.02	-11.86	2.11	4.63
FeO _{tot}	1.24	-1.91	-1.57	-17.89	4.58	-12.56	-6.25
MnO	8.37	29.43	-13.22	217.55	15.66	-116.37	-109.55
MgO	-1.25	-5.37	1.52	-9.35	-6.75	-7.84	19.26
CaO	-2.93	1.63	-1.16	-9.32	-4.88	5.83	2.25
Na ₂ O	0.19	-3.81	-0.31	-8.47	7.10	-1.31	6.52
K ₂ O	-1.56	0.47	0.60	-4.17	-6.67	1.79	2.13
P ₂ O ₅	-5.30	-6.43	17.87	-13.16	33.84	3.08	-23.45
Rb	-0.01	0.02	0.01	0.06	0.06	-0.07	-0.01
Ba	0.01	-0.01	0.01				
Sr	-0.02	-0.01	0.06	0.02	0.20	-0.16	-0.06
Zr	0.01	-0.01	-0.03				
Y	-0.08	0.29	0.26	0.42	-0.44	-0.05	-0.01
Constante	20.10	-182.08	-85.85	50.33	532.44	-20.45	-381.07

% variación	100.00	81.24	18.76	48.94	29.48	12.88	5.13
-------------	--------	-------	-------	-------	-------	-------	------

Tabla 2.- Funciones discriminantes calculadas y porcentaje relativo de variación asociado.

Table 2.- Calculated discriminant functions and associated variation relative percentage.

GRUPO	TODOS		REGIONAL		CIRCUNSCR.	
	C.P.1	C.P.2	C.P.1	C.P.2	C.P.1	C.P.2
SiO ₂	0.33	0.01	0.34	0.08	0.31	-0.19
TiO ₂	-0.33	-0.02	-0.34	-0.06	-0.34	0.16
Al ₂ O ₃	-0.24	0.13	-0.25	0.01	-0.06	0.27
FeO _{tot}	-0.33	-0.01	-0.35	-0.05	-0.34	0.15
MnO	-0.05	0.50	-0.03	0.52	-0.14	0.48
MgO	-0.31	-0.12	-0.31	-0.22	-0.31	0.14
CaO	-0.33	0.10	-0.34	0.16	-0.34	0.11
Na ₂ O	-0.14	0.22	-0.12	0.25	-0.05	0.16
K ₂ O	0.16	-0.47	0.15	-0.49	0.11	-0.42
P ₂ O ₅	0.01	0.56	-0.05	0.53	0.20	0.15
Rb	0.28	0.10	0.27	0.09	0.28	0.19
Ba	-0.30	-0.06	-0.31	-0.03	-0.27	-0.26
Sr	-0.33	-0.01	-0.34	0.02	-0.32	-0.15
Zr	-0.20	-0.26	-0.16	-0.17	-0.26	-0.38
Y	-0.22	-0.22	-0.14	-0.14	-0.27	-0.31
% variación	55.67	16.78	50.07	19.70	52.28	15.27

Tabla 3.- Coordenadas de los dos primeros vectores principales en el espacio multivariante y porcentaje relativo de variación asociado.

Table 3.- Coordinates of the first two eigenvectors inside the multivariate space and associated variation relative percentage.

Tratando por separado el grupo de granitoides regionales y el episodio circunscrito (Tabla 3), se obtienen las mismas conclusiones en cuanto al significado de los dos primeros vectores principales. En el grupo de granitoides regionales

(Figura 3b) se aprecia una evolución continua en las tres litologías que lo componen, desde los términos menos diferenciados (facies común de Navalosa), pasando por términos intermedios (facies porfídica de Navalosa) hasta los granitoides más evolucionados (plutón de Navacepedilla y leucogranitos de Navalosa común). Este hecho permite afirmar que el proceso evolutivo experimentado por los granitoides regionales es el mismo en las tres facies, representando cada una de ellas diferentes etapas en la diferenciación de un único magma parental. En cuanto al conjunto de plutones circunscritos (Figura 3c), el estudio mediante componentes principales revela su gran diversidad, causada por diferencias composicionales en los protolitos de los que proceden y/o por la existencia de variados mecanismos petrogenéticos responsables de su evolución.

Las relaciones existentes entre el primer vector principal y los diferentes elementos analizados apoya las conclusiones antes alcanzadas. Considerando todo el volumen de datos (Figura 4a), y teniendo en cuenta el significado geológico de dicho vector, puede apreciarse que, *grosso modo*, el episodio regional contiene granitoides menos evolucionados (menores valores de C.P.1) y presenta una menor dispersión de los datos, debido a su significación como grupo petrogenético. Dentro del conjunto de granitoides regionales (Figura 4b), la facies común de Navalosa representa en su mayoría a los términos menos diferenciados del grupo, situándose la facies porfídica y el plutón de Navacepedilla entre el grupo mayoritario de la facies común (valores de

C.P.1 entre -5 y 1) y dos leucogranitos diferenciados de ésta (C.P.1 entre 7 y 10). Es por tanto admisible el que las tres litologías representen diferentes estadios en la evolución de un único magma parental, como ya ha sido antes puesto de manifiesto.

Conclusiones

A partir del estudio multivariante de una población de datos geoquímicos pueden obtenerse una serie de consideraciones de ámbito petrogenético. La fundamental es la comprobación de la coherencia como grupo de las muestras, que en términos geológicos representa el cogenetismo entre los diferentes granitoides analizados. El resto de conclusiones, que dependerán en gran medida de las características propias de la población estudiada, permiten caracterizar a los diversos grupos en base a funciones que engloban múltiples variables y que poseen un significado petrogenético. En el caso concreto aquí presentado, las funciones calculadas están directamente relacionadas con el curso de una evolución magmática por fraccionación (análisis de componentes principales), y posibilitan la individualización de las diferentes litologías (análisis mediante funciones discriminantes).

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el proyecto D.G.I.C.Y.T. PB93-0295.

Referencias

Agterberg, F.P. (1974): *Geomathematics. Dev. Geomath.*, 1, 596 pp.
 Bea, F. y Moreno-Ventas, I. (1985): *Stvd. Geol. Salmant.*, 20, 175-203.
 Bellido, F. y Brändle, J.L. (1979): *Sci. Terre*, 13, 111-123.
 Chandrasekaran, V. y Srivastava, R.K. (1992): *Jour. Geol. Soc. India*, 40, 217-233.
 Chappell, B.W. y White, A.J.R. (1974): *Pacific Geol.*, 8, 173-174.
 Davis, J.C. (1986): *Statistics and data analysis in geology. John Wiley & Sons, New York*, 646 pp.
 Debon, F. y Le Fort, P. (1983): *Trans. Roy. Soc. Edin.*, 73, 135-149.
 Herreros, V.M.; Reyes, J.; Bellido, F.; Buyo, F. y Lasala, M. J. (1993): *V Congr. Geoquím. España*, 164-170.
 Herreros, V.M. (en prensa, a): *Bol. Soc. Esp. Min.*, 12 pp.
 Herreros, V.M. (en prensa, b): *Geogaceta*, 4 pp.
 Le Maitre, R.W. (1982): *Numerical petrology Dev. Petrol.*, 8, 281 pp.
 Pearce, J.A.; Harris, N.B. y Tindle, A.G. (1984): *Jour. Petrol.*, 25, 956-983.
 Richard, L.R. y Clarke, D.B. (1989): *Geol. Soc. Amer. Bull.*, 101, 1157-1162.
 Rollinson, H.R. (1993): *Using geochemical data: Evaluation, presentation, interpolation. John Wiley & Sons, New York*, 352 pp.

Figura 4a

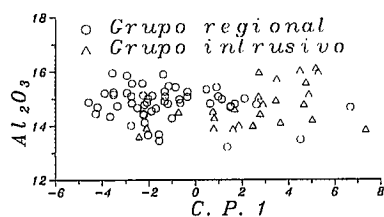


Figura 4b

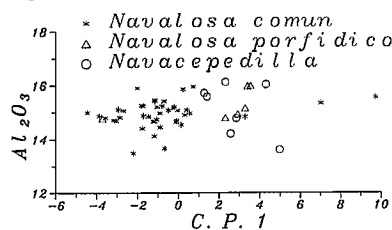


Fig. 4.- Relación entre el primer vector principal y Al₂O₃. a) Para todos los datos. b) Para el grupo regional.

Fig. 4.- Relationship between the first eigenvector and Al₂O₃. a) For the overall data. b) For the regional group